



TITLE:

新規ラジカル重合の開発

AUTHOR(S):

藤田, 健弘

CITATION:

藤田, 健弘. 新規ラジカル重合の開発. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 9-9

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230712>

RIGHT:

新規ラジカル重合の開発

Development of new radical polymerization

京都大学 化学研究所 高分子制御合成領域

藤田 健弘

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、新規ラジカル重合の開発に関わる反応機構の研究を行った。

新規ラジカル重合を開発するにあたり、モノマーと成長末端ラジカルの反応性を理解することは極めて重要である。これらの反応性を調べるために、**Gaussian** ソフトウェアを用いて成長反応の遷移状態を求め、活性化エネルギーを算出した。得られた結果は実験結果と良い一致を示した。今後もより詳細に重合機構を明らかにするために計算サーバーを利用する予定である。